Los operadores en la Mecánica Cuántica y la Ecuación de Schrodinger

Joaquín González Álvarez

Un método de tratamiento de la Mecánica Cuántica (MC) se basa fundamentalmente en sustituir las magnitudes observables por operadores diferenciales propios de cada una. Debemos precisar qué es un operador en matemáticas. Un operador es un símbolo que se antepone a una variable para indicar que se haga cierta operación con ésta. Por ejemplo log es un operador, y $log\ x$ indica que se halle el logaritmo de x, así son operadores sen, tan, etc. Un operador diferencial es d/dx, du/dx indica que se derive u respecto a x. En MC por el método de los operadores, una magnitud como u, se sustituye por un operador como d/dx u otro propio de esa magnitud. En esta exposición vamos a ocuparnos de los correspondientes a las magnitudes *impulso lineal* p, *energía* H y *coordenada* x u otra cualquiera, cuyos operadores los simbolizaremos por p^*, H^* y x^*, respectivamente. Debemos recordar de la Mecánica Clásica que $p = mv$ y $H = T+V$ donde es T la energía cinética y V la energía potencial por lo que

$$H = \frac{1}{2}mv^2 + V$$

Vamos a transformar la expresión de T multiplicando numerador y denominador por m, por lo que

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

Esa es la forma clásica de expresar H. En MC se sustituyen H y p por sus operadores y se tendrá:

$$H^* = \frac{p^{*2}}{2m} + V \qquad (1)$$

Donde

$$p^* = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x} \qquad (2)$$

Poniendo (2) en (1):

$$H^{*} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \qquad (1)$$

operador que recibe el nombre de Hamiltoniano el cual por razones didácticas hemos limitado a la variable x.

El operador coordenada x^* tiene por expresión $x^* = x$.

La Ecuación de Schrodinger (ES) es la fundamental de la MC, viene a ser como $F = ma$ para la Mecánica Clásica.

En esta exposición elemental nos limitaremos a tratar la ES estacionaria, esto es el caso particular de no dependencia del tiempo.

La ecuación de Schrodinger en forma muy sintética se expresa así:

$$H^{*}\Psi = E\Psi$$

Donde E energía mecánica y Ψ función de onda.

Vamos a establecer la ES por razones didácticas limitándonos a una sola variable, para lo cual sustituiremos en la última expresión H^* mediante (1):

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\Psi = E\Psi \qquad (2)$$

Como primer ejemplo aplicaremos la ES al sencillo sistema cuántico de la partícula libre o sea para $V=0$, para lo cual (2) toma la siguiente forma:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = E\Psi$$

Y por lo tanto:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{8\pi^2 mE}{h^2}\Psi \qquad (3)$$

La Ec. (3) es una ecuación diferencial lineal homogénea que podemos resolver por el método del operador diferencial *D* de la siguiente forma:

$$D^2 = -\frac{8\pi^2 mE}{h^2}$$

en el segundo miembro de la igualdad anterior realizamos la sustitución $E = \frac{p^2}{2m}$:

$$D^2 = -\frac{4\pi^2 p^2}{h^2}$$

Y por lo tanto:

$$D = \pm i\frac{2\pi p}{h}$$

En la expresión anterior introducimos la longitud de onda de De Broglie que es igual a h/p con lo que nos encontramos con el número de onda k lo cual nos permite escribir:

$$D=\pm ik$$

y expresar la solución de la ES para la particula libre así:

$$\Psi = A.e^{ikx}$$

y en forma mas sencilla:

$$\Psi = A.sen\,kx \qquad (4)$$

Conociendo las condiciones de contorno para un caso específico del movimiento de la partícula, por ejemplo cuando ocurre en un pozo de potencial de ancho l, esto es entre barreras en $x=0$ y $x=l$, podremos calcular la constante k procediendo del siguiente modo:

Para $x = 0 \quad \Psi = 0$, por lo cual:

$sen\,kx = 0 \quad kx = n\pi$ y para $x=l \quad \Psi=0$ y $kx = kl = n\pi$

de modo que $k = n\pi/l$ y la solución será:

$$\Psi = A.sen(n\pi/l)x \qquad n = 0,1,2,...$$

El hecho de que Ψ dependa de valores discretos da idea de su carácter cuántico o sea que la función de onda está cuantificada.

Veremos que la energía E también está cuantificada, para ello tenemos que volver a referirnos a la antes vista igualdad:

$$\frac{8\pi^2 mE}{h^2} = k^2$$

donde sustituyendo $k = n\pi/l$ y despejando *E*:

$$E = \frac{n^2 h^2}{8ml^2} \qquad n = 0,1,2,...$$

lo cual muestra que la energía está cuantificada.

En MC la probabilidad de que la partícula esté en un punto es proporcional a Ψ^2 donde Ψ se evalúa para las coordenadas del punto. Como la partícula tiene que estar entre *0* y l, la integral entre 0 y l de $\Psi^2 dx$ tiene que ser igual a *1* y $A = 1/\sqrt{2}$ con lo cual la solución del problema que tratamos queda así:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} sen\left(\frac{n\pi}{l}\right)x \qquad n = 0,1,2,...$$

Con la elemental exposición que hemos ensayado esperamos habernos acercado didácticamente al método de los operadores en Mecánica Cuántica.

Joaquín González Álvarez

j.gonzalez.a@hotmail.com